

Моделирование безнапорной фильтрации раствора переменной плотности в двупористой среде с помощью кода GeRa

И.В. Капырин, И.Н. Коньшин, Ф.В. Григорьев, В.К. Крамаренко

Институт вычислительной математики РАН
Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН



RuSCDays – 2018
Москва, 24-25 Сентября 2017 г.

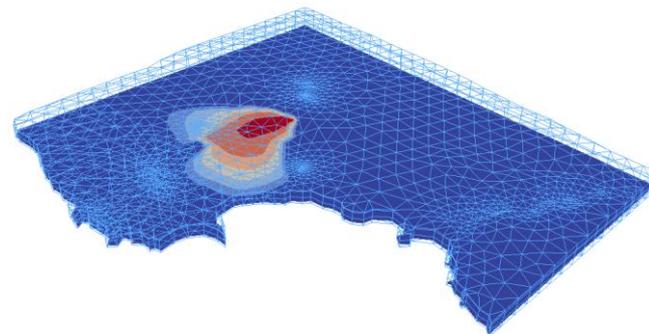
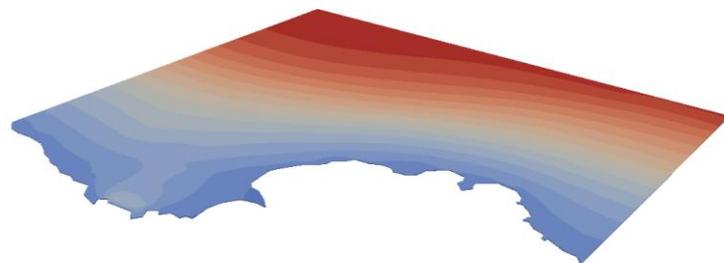
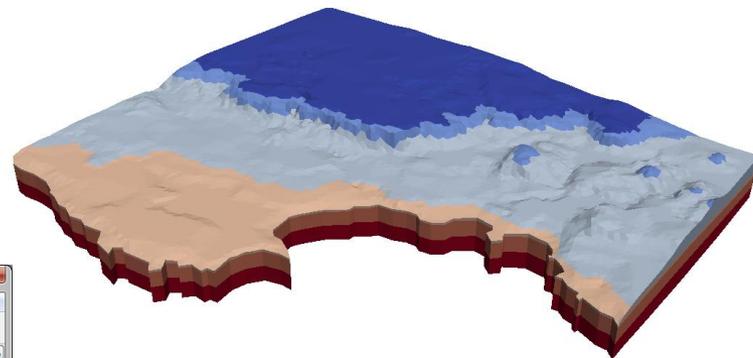
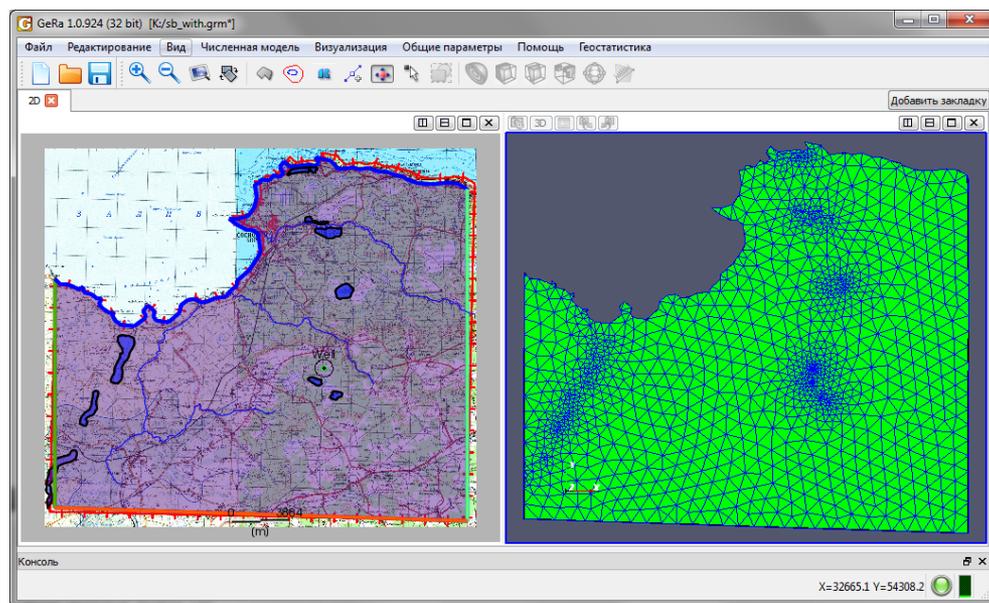
Outline

1. Мотивация работы и решаемая задача.
2. Математическая модель.
3. Методы дискретизации.
4. Применение на объекте.
5. Результаты параллелизации.

Возможности кода GeRa сегодня

Моделирование:

- геологическое
- геофильтрационное
- геомиграционное



- Код аттестован для обоснования безопасности ОИАЭ.
- Платформа – **INMOST** (www.inmost.org).
- Параллелизация – MPI.

Основные моделируемые процессы

1

• **Фильтрация** (напорно-безнапорный режим, ненасыщенная, двухфазная);

2

• **Адвективно-диффузионно-дисперсионный массоперенос** (в гомогенной и двухпористой средах);

3

• **Геохимия** (по изотерме и с расчетом реакций);

4

• **Цепочки радиоактивного распада;**

5

• **Плотностная конвекция;**

6

• **Теплоперенос, тепловыделение** при радиоактивном распаде;

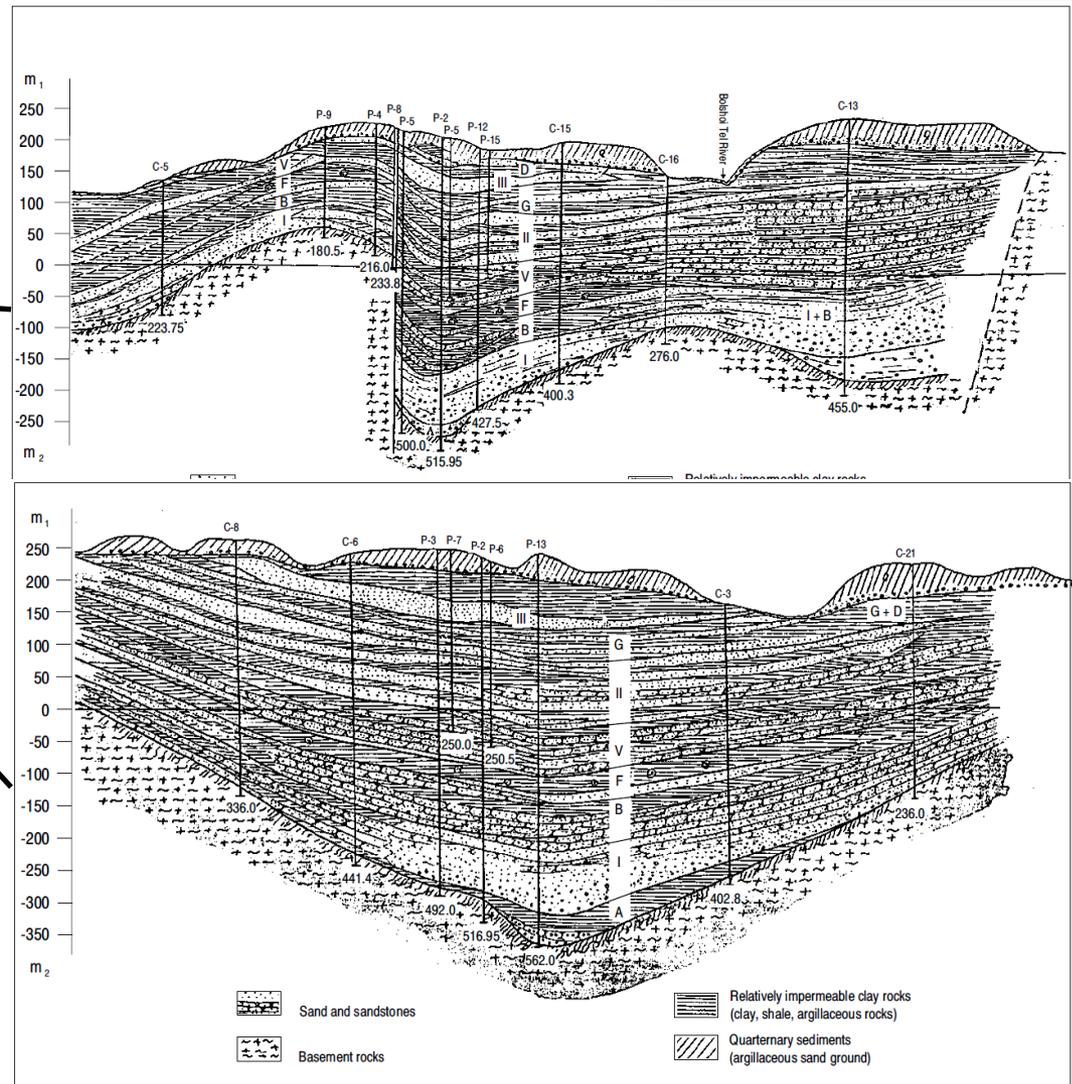
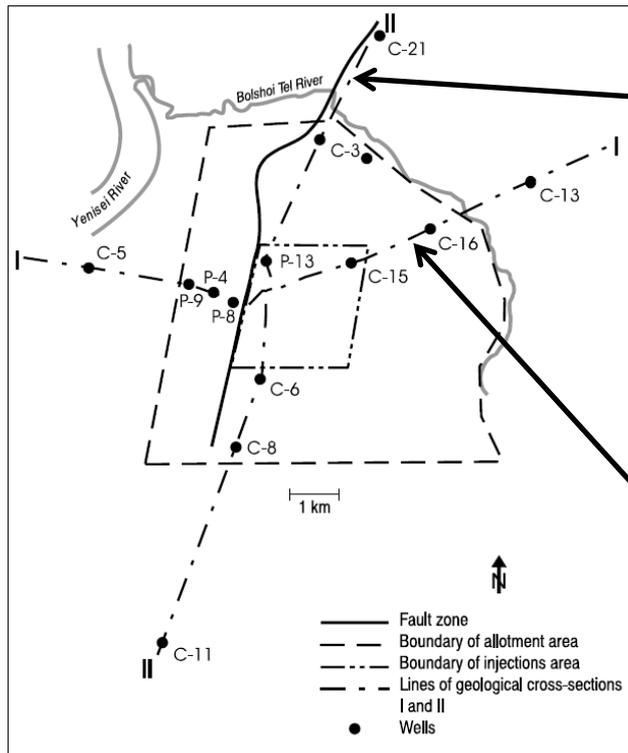
7

• **Тепловая конвекция** с переменной вязкостью растворов;

8

• **Коллоидный перенос веществ;**

Геологические особенности полигона



- 10 геологических слоев;
- Разлом;
- Выклинивания слоев.

Математическая модель

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial(\theta_m \rho_m)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{r}) = Q \rho_s - \rho_{exch} \Gamma_w, \\ \frac{\partial \theta_{im}}{\partial t} = \Gamma_w, \\ \frac{\partial \left((\theta_m + \rho_{b_m} k_{d_{i,m}}) C_{i,m} \right)}{\partial t} + \lambda \left(\theta_m + \rho_{b_m} k_{d_{i,m}} \right) C_{i,m} + \nabla \cdot (\mathbf{r} C_{i,m}) - \nabla D_{i,m} \nabla C_{i,m} + \\ \quad + \zeta (C_{i,m} - C_{i,im}) = Q C_{i,s} - C_{exch} \Gamma_w, \quad i = 1 \dots N_{comp}, \\ \frac{\partial \left((\theta_{im} + \rho_{b_{im}} k_{d_{i,im}}) C_{i,im} \right)}{\partial t} + \lambda \left(\theta_{im} + \rho_{b_{im}} k_{d_{i,im}} \right) C_{i,im} = \\ \quad = \zeta (C_{i,m} - C_{i,im}) + C_{exch} \Gamma_w, \quad i = 1 \dots N_{comp}. \end{array} \right.$$

+ Закон Дарси для течения в проточной зоне.

+ Зависимость плотности от концентрации $\rho = \rho_0 + \sum_{i=1}^{N_{comp}} \kappa_{vol,i} C_i$.

+ Интенсивность влагообмена Γ_w (?).

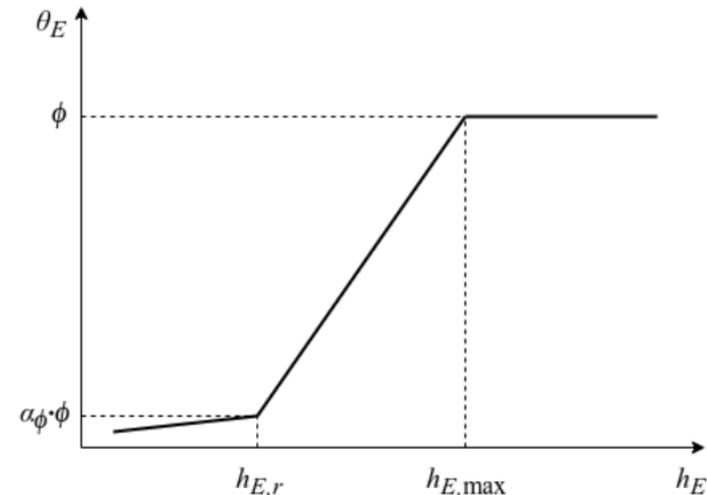
+ Модель гидравлических свойств сред.

Аспекты моделирования течения в безнапорных условиях

- Псевдоненасыщенный подход, основанный на уравнении Ричардса.
- Относительная проницаемость в ненасыщенной зоне мала в сравнении с насыщенной.
- Относительная проницаемость в ячейке сетки изменяется линейно от минимального значения (влагосодержание близко к нулю) до максимального (полное насыщение) с ростом уровня воды в ячейке.

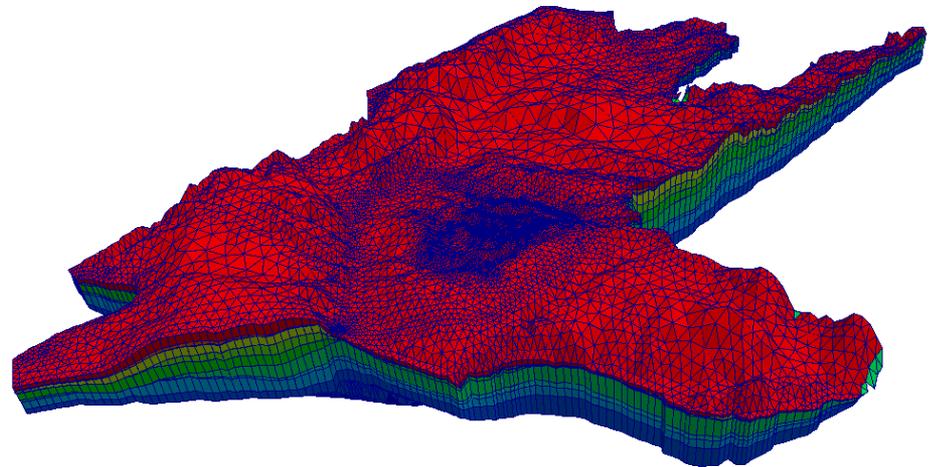
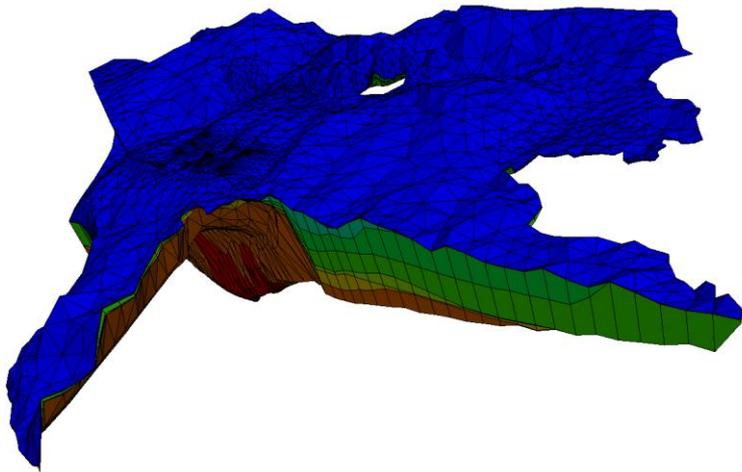
$$\theta_E(h_E) = \begin{cases} \phi, & h_E > h_{E,\max}, \\ \phi \cdot \frac{h_E - h_{E,\min}}{h_{E,\max} - h_{E,\min}}, & h_{E,r} < h_E \leq h_{E,\max}, \\ \phi \cdot (\alpha_\phi - \alpha_\theta(h_{E,r} - h_E)), & h_E \leq h_{E,r}, \end{cases}$$

$$K_r(h_E) = S(h_E) = \frac{\theta_E(h_E)}{\phi}$$



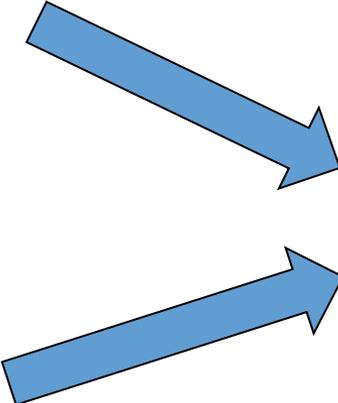
Сложности модели

- Неизвестные параметры функции водообмена между мобильной и немобильной зонами Γ_w .
- Необходимость разработки численной модели течения в среде с двойной пористостью.
- Плохая обусловленность линейных систем.
- Большие времена счета.



Упрощающие предположения

1. Двойная пористость важна только в напорных горизонтах.
2. Влагообмен между проточной и непроточной зонами характерен только в верхних слоях.


$$\theta_{im} = \varphi_{im} = const,$$

$$\Gamma_w = 0.$$

Упрощенная модель

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_m \frac{\partial \theta_m}{\partial t} + \rho_m S_m S_{stor} \frac{\partial h}{\partial t} + \theta_m \sum_{i=1}^{Ncomp} \kappa_{vol,i} \frac{\partial C_{i,m}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{u}^r) = Q \rho_s, \\ \frac{\partial \left((\theta_m + \rho_{b_m} k_{d_{i,m}}) C_{i,m} \right)}{\partial t} + \lambda (\theta_m + \rho_{b_m} k_{d_{i,m}}) C_{i,m} + \nabla \cdot (\mathbf{u}^r C_{i,m}) - \nabla D_{i,m} \nabla C_{i,m} + \\ \quad + \zeta (C_{i,m} - C_{i,im}) = Q C_{i,s}, \quad i = 1 \dots Ncomp, \\ \varphi_{im} R_{im} \frac{\partial C_{i,im}}{\partial t} + \lambda \varphi_{im} R_{im} C_{i,im} = \zeta (C_{i,m} - C_{i,im}), \quad i = 1 \dots Ncomp. \end{array} \right.$$

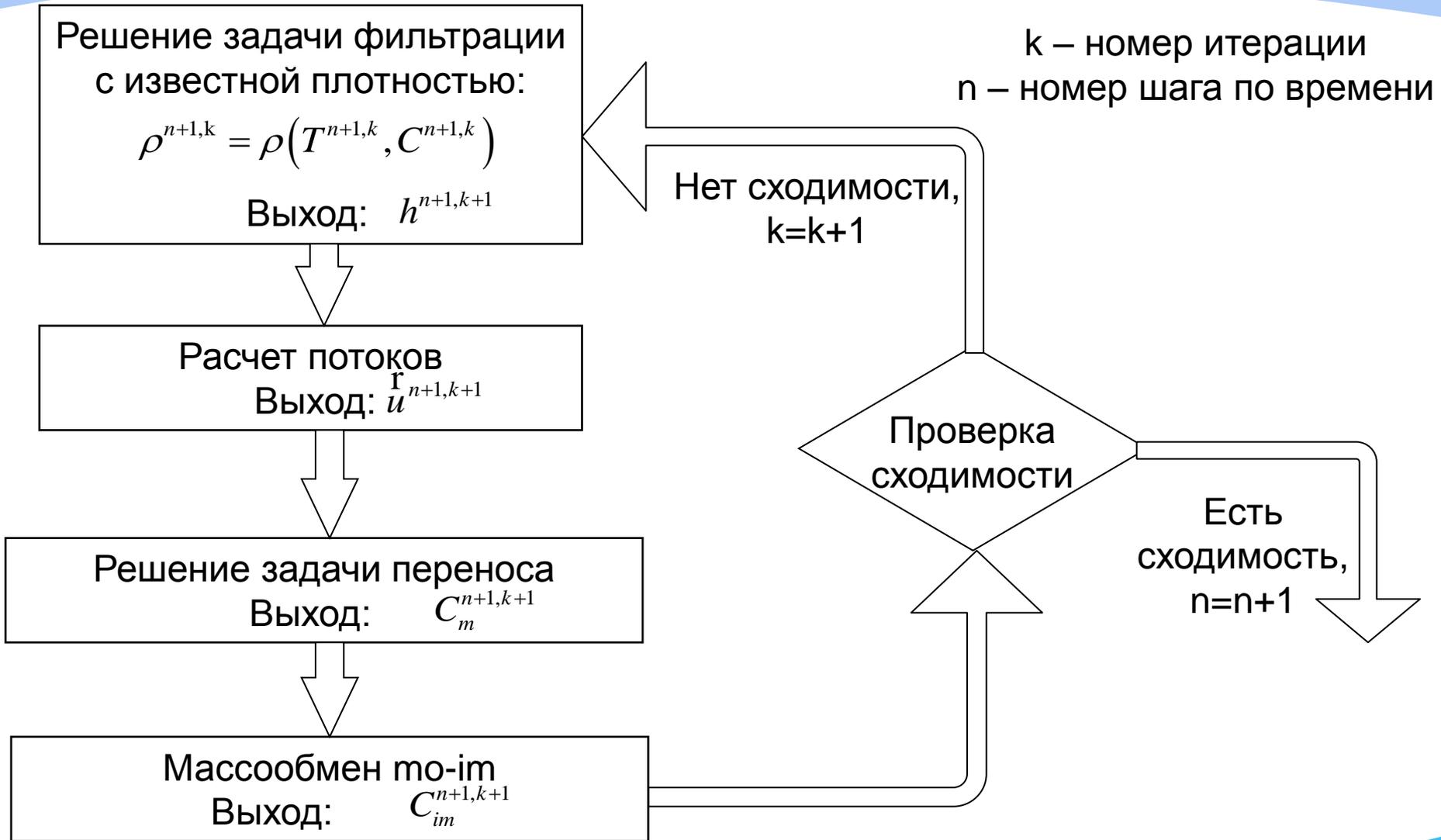
Течение

Перенос

Массобмен

- $m = \text{mobile}$, $im = \text{immobile}$.
- R_{im} – коэффициент сорбционной задержки для немобильной зоны.

Итерационная схема шага по времени



Методы дискретизации по пространству

- Задача фильтрации:
 - Линейная двухточечная схема.
 - Многоточечная O-схема.
 - Нелинейный монотонный МКО.
- Задача переноса:
 - Явная адвекция (TVD) – неявная диффузия (МКО).
 - Полностью неявный линейный МКО 1-го порядка.
 - Нелинейный монотонный МКО.

Методы дискретизации по пространству

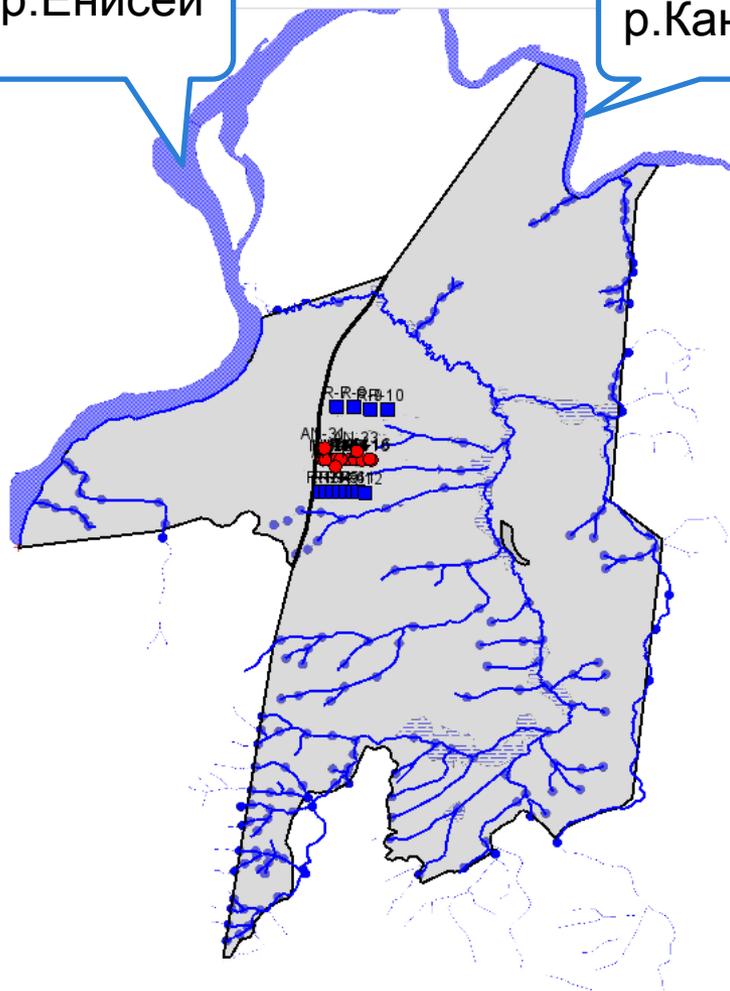
- Задача фильтрации:
 - Линейная двухточечная схема.
 - Многоточечная O-схема.
 - Нелинейный монотонный МКО.
- Задача переноса:
 - Явная адвекция (TVD) – неявная диффузия (МКО).
 - Полностью неявный линейный МКО 1-го порядка.
 - Нелинейный монотонный МКО.

Используются при моделировании полигона

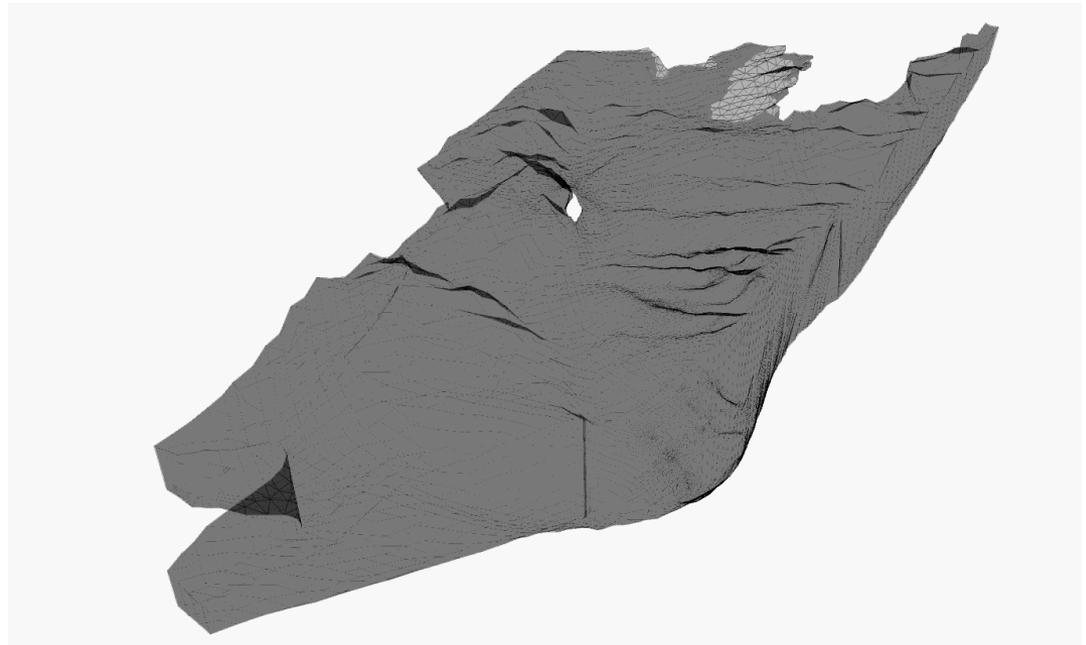
Моделирование полигона «Северный»

р.Енисей

р.Кан



Расчетная область



Закачка плотных растворов в I горизонт

Параметры параллельных расчетов

Модели:

- «Малая» модель – 43 тыс. ячеек, сектор x6core.
- «Большая» модель – 421 тыс. ячеек, сектора x8-x12core.

Кластер ИВМ РАН:

- x6core: 12 вычислительных узлов Asus RS704D-E6 (два 6-ядерных процессора Intel Xeon X5650@2.67 GHz), 24GB RAM;
- x8core: 16 вычислительных узлов Arbyte Alkazar+ R2Q50 (два 8-ядерных процессора Intel Xeon E5-2665@2.40 GHz), 64GB RAM;
- x10core: 20 вычислительных узлов Arbyte Alkazar+ R2Q50 (два 10-ядерных процессора Intel Xeon E5-2670v2@2.50ГГц), 64GB RAM;
- x12core: 4 вычислительный узел Arbyte Alkazar+ R2Q50 (два 12-ядерных процессора IntelXeon E5-2670v3@2.30 GHz), 64 GB.

Анализ параллельной эффективности

«Малая» модель

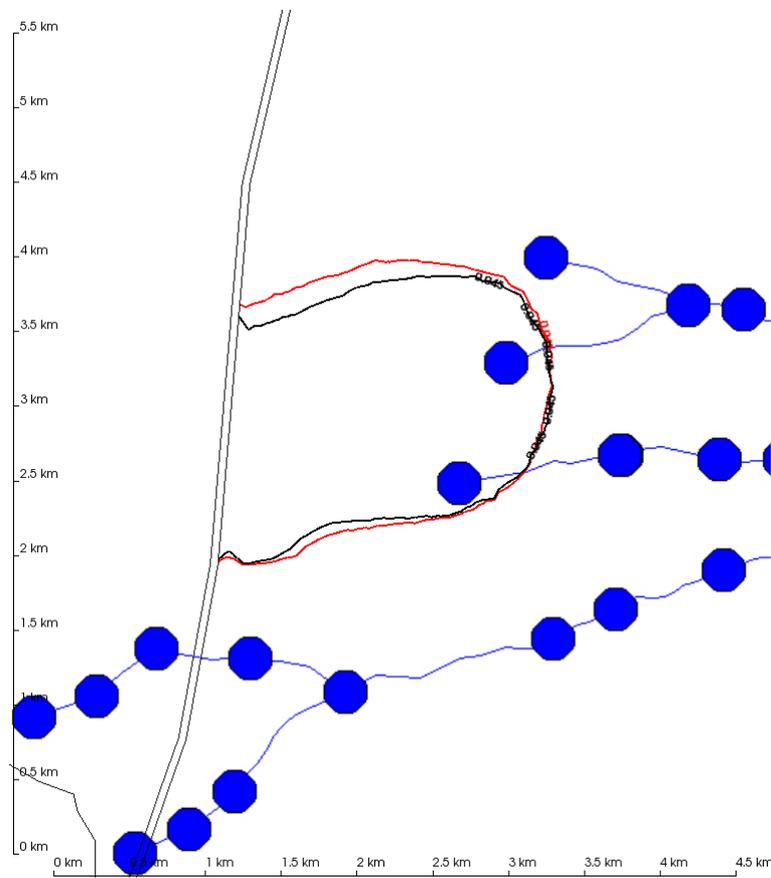
#проц	Время счета, с	Ускорение	S_2
1	1104.08	1.00	–
2	642.87	1.71	1.71
4	384.39	2.87	1.67
8	218.83	5.04	1.75
16	142.13	7.76	1.53
32	82.84	13.32	1.71

«Большая» модель

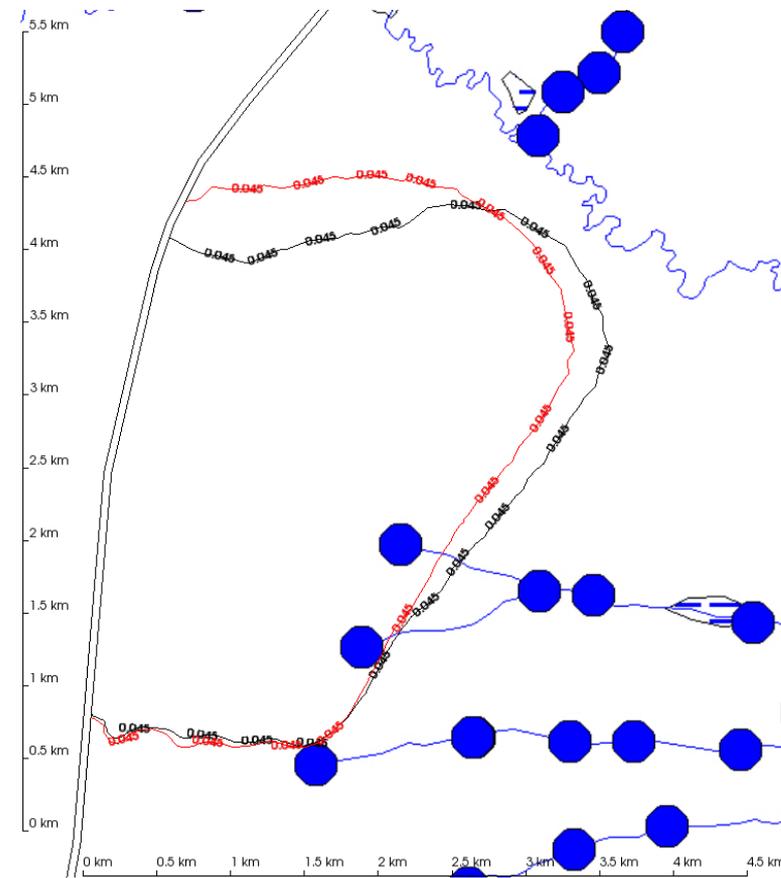
#проц	Время счета, с	Ускорение	S_2
1	67214	1.00	–
2	45161	1.48	1.48
4	22870	2.93	1.97
8	18147	3.70	1.26
16	9470	7.09	1.91
32	7515	8.94	1.26
64	5013	13.40	1.49
128	3150	21.33	1.59
256	2130	31.54	1.47

Результаты: ореол NaNO_3 в I горизонте

50 лет закачки



1000 лет после закрытия полигона



красный – с учетом плотности, черный – без него

Выводы

- На масштабе 50 лет плотностные эффекты пренебрежимо мало влияют на распространение загрязнения на полигоне.
- На масштабе 1000 лет влияние плотностной конвекции на структуру потока более существенно.
- Требуются оценки на больших временных масштабах. Плотностная конвекция предположительно замедляет миграцию загрязнения.

Спасибо за внимание!